



TITLE:

時間可逆な分子動力学法によるマ  
クロ現象の不可逆性の研究:  
Boltzmann の H 定理から爆縮過程  
の膨張衝撃波まで(乱流と輸送現象  
:コーヒーカップから宇宙まで)

AUTHOR(S):

Komatsu, Nobuyoshi; Abe, Takashi

---

CITATION:

Komatsu, Nobuyoshi ...[et al]. 時間可逆な分子動力学法によるマクロ現象の不可逆性の研究: Boltzmann の H 定理から爆縮過程の膨張衝撃波まで(乱流と輸送現象: コーヒーカップから宇宙まで). 数理解析研究所講究録 2007, 1567: 102-110

ISSUE DATE:

2007-08

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/81194>

RIGHT:

# 時間可逆な分子動力学法によるマクロ現象の不可逆性の研究 ～Boltzmann の H 定理から爆縮過程の膨張衝撃波まで～

金沢大学

小松 信義 (Nobuyoshi Komatsu)

Kanazawa University

宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究本部 安部 隆士 (Takashi Abe)

The Institute of Space and Astronautical Science/JAXA (ISAS/JAXA)

本稿は、筆者らの既発表論文 [文献(1)-(3)] の概要を本講究録用に再編したものです。

## 1. 緒言

拡散現象に代表されるマクロ現象は一般に不可逆であると考えられているが、時間可逆なミクロな基礎物理法則を用いて、この不可逆性はどのように説明されるのだろうか？この不可逆性の問題を説明するため、十九世紀にBoltzmannは気体分子運動論を用いて、非平衡状態にある系が平衡状態へ到達することの証明 (H定理) を試みた<sup>(4)</sup>。しかし、このH定理はLoschmidt, Zermeloらによる本質的な批判 (可逆性パラドックス, 再帰定理など) を受けた。例えば, Loschmidtは, 「力学の可逆性に基づく限り, 全粒子の速度の方向を一斉に反転した時間反転モデルを考えると, 系は平衡状態から非平衡状態に戻るはずである。従って, H定理は成立しないはずである (可逆性パラドックス)」と, BoltzmannのH定理の矛盾点を的確に指摘している。以来, 不可逆性の問題は, 様々な研究者により研究されているものの, 現在も未解決である<sup>(5,6)</sup>。

このような不可逆性は, マクロな現象論を対象とする流体力学の分野にも現れる。例えば, 超新星爆発などで見られる衝撃波は, 衝撃波通過後に気体等の媒体が圧縮されるいわゆる圧縮衝撃波である。しかし, 衝撃波特有の不連続性を有し, 且つ, 衝撃波の通過後にその媒体が膨張する膨張衝撃波は, 気体中では存在しないと考えられている<sup>(7)</sup>。一般には, この理由として「エントロピー増大の法則のため, 膨張衝撃波は存在しない」というマクロな現象論的説明がされている。しかし, 気体を構成する分子運動が, Newtonの運動方程式に代表される時間可逆なミクロな物理法則に支配されていることを思い出すと, 上記の不可逆性の問題に帰着する。すなわち, ミクロな基礎物理法則の視点から見ると, 膨張衝撃波が気体中に存在しない理由は, マクロな現象論で説明されているほど明らかではないのである。

ここで, 以下の「思考実験」を行うと, 容易に膨張衝撃波が形成される。具体的には, 爆発現象 (Explosion) と爆縮現象 (Implosion) の双対性に注目し, 爆発現象で生じた圧縮

衝撃波を構成する気体の全分子を、ある時刻に一斉に時間反転させ、時間反転後の爆縮過程を考える。すなわち、Loschmidtの可逆性パラドックスで指摘されている時間反転モデルを、爆発現象に適用するのである。爆発過程では圧縮衝撃波が中心から外側へと伝播していく。一方、時間反転後の爆縮過程では、ミクロな基礎物理法則の時間可逆性に基づくと、膨張衝撃波が形成され、中心に向かって伝播していくはずである。この‘思考実験’で形成される膨張衝撃波は、物理的プロセスとして許容されるのだろうか？また、許容されないならば、その理由は何なのだろうか？

気体は多数の分子から構成されていることを思い出すと、このような膨張衝撃波をミクロな物理法則の視点から研究するためには、分子運動をN体問題として解析可能な分子動力学法 (Molecular Dynamics method: MD) が適していると考えられる。しかし、圧縮衝撃波はMDを用いて多数研究<sup>(8,9)</sup>されているものの、実は、MDを用いた膨張衝撃波の研究は行われていない。これは、膨張衝撃波のような不安定な系を、ランダムノイズ (丸め誤差) が発生する通常の数値解析手法で解析することが困難であったためと考えられる。例えば、1967年にOrbanらは、剛体円盤によるMD手法を用いて、可逆性パラドックスに対応する全粒子の速度の方向を一斉に反転する解析を行い、その結果、丸め誤差のために力学系が初期状態に復帰しない、すなわち、数値的不可逆性が発生することを報告している<sup>(10)</sup>。しかし、近年、筆者らは、ノイズの全く発生しない厳密に時間可逆なBit可逆アルゴリズム<sup>(11)</sup>を用いて、不安定系を解析する新手法を提案した<sup>(1-3)</sup>。この新手法を用いれば、数値解析に内在する数値的不可逆性だけでなく、自然界にみられるマクロ現象の不可逆性を、厳密に時間可逆な基礎物理法則の視点から検討可能である。

従って、本研究では、自然界にみられるマクロ現象の不可逆性を検討するため、ミクロな基礎物理法則の時間可逆性を厳密に再現するBit可逆アルゴリズム (Bit MD) を用いて、不可逆過程と考えられている現象 (拡散、衝撃波) の解析を行う。3章では、Loschmidtの可逆性パラドックスを模擬した拡散現象の「時間反転モデル」を対象に、Bit MDを用いて解析を行い、Bit MDの時間可逆性を確認する。さらに、浮動小数点演算に基づく通常のMD解析で発生する数値的不可逆性の特性を検討する。4章では、ミクロな物理法則の視点から膨張衝撃波を検討するため、Bit MDを用いて、爆発現象を時間反転した爆縮過程を解析する。さらに、この爆縮過程に微小ノイズを与え、膨張衝撃波が消失するメカニズムの検討を試みる。

## 2. Bit可逆アルゴリズム

通常の数値解析は、計算時に浮動小数点演算を使用するため、丸め誤差の発生を避けることができない。しかし、不安定な系を解析する場合、丸め誤差のようなランダムノイズが指数関数的に増加するため、解析結果に大きな影響を与えられと考えられる。従って、本稿で検討を試みる「N体系の時間反転モデル」、「膨張衝撃波」のような不安定問題を解析する場合は、可能な限りノイズの影響を除去することが望ましい。

以上を踏まえて、本研究では、1993年にLevesqueとVerletにより開発されたBit可逆アルゴリズム (Bit MD) を使用する<sup>(11)</sup>。Bit可逆アルゴリズムは、丸め誤差による数値的不可逆性を回避し、厳密な時間可逆性を実現するMD計算用のアルゴリズムである。

Bit可逆アルゴリズムの特徴は、

- [1] スキーム上での時間可逆性を保持するため、時間差分にleap-frogアルゴリズム (Verletアルゴリズム) を用いる。
- [2] 計算時の丸め誤差の影響を除去するため、座標空間として連続空間の代わりに離散空間を用い、さらに整数演算と組み合わせる。

などが挙げられる。これらの工夫により、Bit可逆アルゴリズムは、丸め誤差の影響を取り除き、厳密な時間可逆性を実現することが可能になる。

例えば、三次元の連続座標空間  $(X,Y,Z)$  の解析を行う場合、立方体セルの一辺の長さ  $L$  と適当な整数  $M$  を用いて最小格子幅  $\Delta L (=L/M)$  を設定し、この最小格子幅を長さの基準単位として、連続座標空間  $(X,Y,Z)$  を離散座標空間  $(x,y,z)$  へと変換する。従って、粒子は、この離散座標空間の格子点上のみを移動する。但し、整数  $M$  の値は、 $n$ -bit の整数を用いる場合、最大で  $M=2^n$  となる。

Bit可逆アルゴリズムに基づく運動方程式は次式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} (\Delta t)^2 &\equiv x_i(t + \Delta t) - 2x_i(t) + x_i(t - \Delta t) \\ &= \sum_j \left[ \left( \frac{f_{ij}}{m} \right)_{t=t} \left( \frac{(\Delta t)^2}{\Delta L} \right) \right]_{Integer} \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 $f_{ij}$  は、離散空間上での位置  $x_i$ 、時刻  $t$  における  $i$ -番目の粒子の  $j$ -番目の粒子からの partial force を表す。この partial force の算出後に、Eq.(1) の右辺の各項を整数化することで、離散空間上の座標を算出する。以上の手法により、ミクロな物理法則の時間可逆性を厳密に満たす理想的な MD 解析が実現される。尚、N 体系の数値解析手法としての Bit MD の妥当性は、通常の MD 計算等の比較により事前に確認している<sup>(1)</sup>。

### 3. Boltzmann の H 定理と時間反転モデルの解析

Bit可逆アルゴリズム (Bit MD) は時間可逆であるため、Loschmidt の可逆性パラドックスをシミュレートすると、Boltzmann の H 関数は初期状態に厳密に復帰し、H 定理は破れると予想される。従って、本章では、この Bit MD の時間可逆性を確認するため、非平衡な初期状態から平衡状態へと移行する系を設定し、ある時刻に時間反転操作を行う「時間反転モデル」を解析する。さらに、丸め誤差などのノイズが「時間反転モデル」の解析結果に与える影響を検討するため、通常の浮動小数点演算による MD 解析 (Float MD)、および定量的に制御したノイズを Bit MD に付加した解析を実施する。

本章で用いる時間反転モデルの解析手順を以下にまとめる。尚、本解析は、現象の理解および解析を容易にするため、2次元解析である。

- [1] 非平衡な初期状態を設定するため、初期条件として、正方形セル内の直交格子点上に粒子を配置し、同一の大きさの速度ベクトルを任意方向に与える。
- [2] この系を初期状態から時間発展させ、時間発展の途中のある時刻  $t_{rev}$  (反転時刻) において、全粒子の速度の方向を一斉に反転 (速度反転操作) させる。この速度反転操作がいわゆる時間反転操作に相当する。
- [3] 反転時刻  $t_{rev}$  から時刻  $2t_{rev}$  まで、さらに系を時間発展させる。

また、系の非平衡度の時間変化を定量的に評価するため、次式で定義される Boltzmann の H 関数を用いる。

$$H \equiv \int f \ln f dv \quad (2)$$

ここで、 $f$  は速度分布関数である。Boltzmann の H 定理によると、任意の初期状態に対応する H

関数は、孤立系で減少し、やがて熱平衡状態に相当する値に到達することが知られている。すなわち、H関数は、エントロピーの符号を変えたものに相当すると解釈できる。

時間反転モデルの解析は、周期境界条件を課した正方形セルを用いた2次元ミクロカノニカル解析であり、孤立系のエネルギー一定解析に相当する。解析条件は、粒子数 $N=1600$ 、数密度 $\rho=0.25 [\sigma^{-2}]$ 、初期温度 $T_0=2.0 [\varepsilon/k_B]$ 、時間刻み $\Delta t=0.01 [\sigma(m/\varepsilon)^{1/2}]$ 、セル長 $L=80 [\sigma]$ と設定した。また、分子間相互作用として次式のLennard-Jonesポテンシャルの斥力部分のみを考慮する。

$$P(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

但し、ポテンシャルを $r_c=2^{1/6} [\sigma]$ でカットオフする。また、 $\sigma$ ,  $\varepsilon$ ,  $m$ ,  $\varepsilon/k_B$ ,  $\sigma(m/\varepsilon)^{1/2}$ は、長さ、エネルギー、質量、温度、時間の単位である（Lennard-Jones単位系）。尚、Bit MD解析の演算精度は30bit-integersとした。

上記設定に基づく時間反転モデルを解析し、Bit可逆アルゴリズムの時間可逆性（Bit MD）を確認してみよう（Fig.1の実線）。Fig.1から、時間反転時刻前（ $t < t_{rev}$ ）までは、H関数は時間とともに徐々に減少し、平衡状態に相当する値にほぼ到達する（Fig.1では、時間反転操作は $t_{rev}=3, 4, 5, 6$ の4ケースに適用している）。一方、時間反転後（ $t > t_{rev}$ ）は、徐々にH関数が回復（増加）し、どのケースでも、時刻 $t=2t_{rev}$ で初期値に厳密に復帰する。すなわち、以上の解析から、Bit MDの時間可逆性が確認できる。このH関数が増加するという挙動は、H定理に反し、非物理的であるとも考えられるが、ミクロな基礎物理法則の可逆性を満足していることに注意しよう。

Fig.1には、丸め誤差の影響を検討するため、通常の浮動小数点演算によるMD解析を併せてプロットしている（○印：Float MDと図示）。但し、Bit MDと演算精度を同程度にするため、通常の浮動小数点演算によるMD解析（Float MD）は単精度（32bit）で解析した。Fig.1から、Float MDは丸め誤差の影響により、時間反転時刻 $t_{rev}$ が大きくなるにつれ、徐々にH関数が初

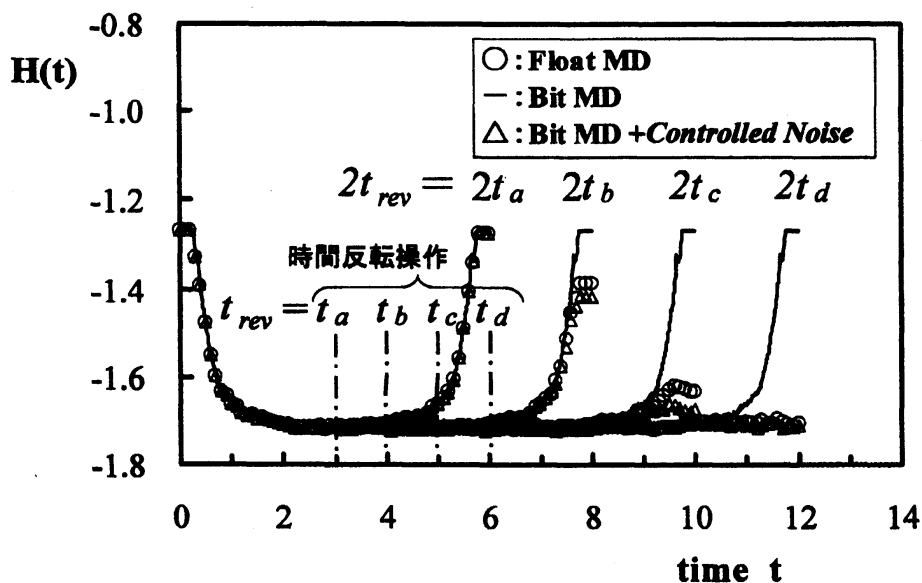


Fig.1 Time evolution of H-function.

期値に回復しなくなることが分かる。すなわち、Float MDでは、Orbanらの指摘した数値的不可逆性が発生していることが再確認される。

このように通常の浮動小数点演算によるMD (Float MD) は、丸め誤差による数値的不可逆性が発生する。一方、オリジナルのBit MDは、Fig.1で確認したように完全に時間可逆である。従って、制御された定量的なノイズ(Controlled noise)をBit MDに付加すれば、Float MDで発生する丸め誤差の影響を模擬できるのではないだろうか？。以下、このアイデアに基づき、Controlled noiseを付加したBit MD解析を試みる。

ここで、Controlled noiseのパラメータとして、[1]ノイズ粒子のシフト量 $dX_{cn}$ ，[2]ノイズが付加される頻度 $F_{cn}$ ，[3]ノイズ粒子数 $N_{cn}$ の3つのパラメータを用いる。具体的には、任意に選択した $N_{cn}$ 個の粒子をシフト量 $dX_{cn}$ ，頻度 $F_{cn}$ でランダム方向に移動させることでControlled noiseを与える。本検討では、丸め誤差の大きさ、発生頻度等を考慮し、Controlled noiseを全粒子、全時間stepに与える。尚、ノイズ粒子のシフト量は、Float MD(32bit)の丸め誤差と同程度になるように、 $dX_{cn}=1[\Delta L]$ と設定する(最小格子幅 $\Delta L=7.5\times 10^{-8}$ 。本研究の単位系では、分子直径が1に相当することから、最小格子幅は極めて小さい)。

Controlled noiseを付加したBit MD解析結果は、Fig.1に「Bit MD+ Controlled Noise」( $\Delta$ 印)としてプロットされている。Bit MD+ Controlled Noiseは、Float MDと同様に反転時刻 $t_{rev}$ が大きくなるにつれH関数が初期値に回復しなくなり、その回復の度合いもFloat MDと同程度である。このように、Bit MDに適切なノイズを付加することで、丸め誤差に起因する数値的不可逆性の影響を模擬できることが分かる

#### 4. 爆縮過程の膨張衝撃波と微小ノイズ

前章では、ミクロな基礎物理法則の時間可逆性を実現するBit MDの有効性を確認し、さらに、微小ノイズを付加することで通常のMD計算で発生する数値的不可逆性を模擬できることを示した。本章では、ミクロな物理法則の視点から膨張衝撃波を検討するため、厳密に時間可逆なこのBit MDを用いて、爆発現象を時間反転した爆縮過程を解析する。さらに、爆縮過程に微小ノイズを与え、膨張衝撃波が消失するメカニズムの検討を試みる。

本章で「爆発現象を時間反転した爆縮過程」を解析するためには、爆発過程の解析が必要である。従って、はじめに、爆発過程の解析方法と時間反転操作による爆縮過程の解析方法について簡単に説明する。尚、本章の解析も2次元解析であり、単位系も3章と同一である。

##### [1] 爆発過程 (Explosion process) :

正方形セル内に希薄気体に相当するbackground gasを準備する。セル中央部分には、半径 $r_H$ の高温・高圧の円形状のhot dropletを配置する。この設定を初期条件として、爆発現象のミクロカノニカル解析(エネルギー一定)を行う。Hot dropletの初期条件は数密度0.8，温度3.0，粒子数3600，また、background gasの初期条件は数密度0.08，温度 $\sim 0.0$ ，粒子数7891と設定する。従って、hot dropletとbackground gasの全粒子数 $N$ は11491である。時間刻みは $\Delta t=0.005$ ，総ステップ数は4000(総時間は $t_{ex}=20$ )と設定する。尚、円形状のhot dropletの半径 $r_H$ は約37.8である(分子直径が1)。

##### [2] 爆縮過程 (Implosion process) :

爆縮過程の解析には、上記[1]の爆発解析により得られた最終時刻 $t_{ex}=20$ の結果を利用し、その結果に時間反転操作を施す。具体的には、3章の時間反転モデルと同様に、爆発解析の $t_{ex}=20$ の全粒子の速度ベクトルの方向を一斉に反転させ、反転後の速度ベクトルを時刻 $t_{im}=0$ の速度ベクトルとする。尚、時間刻み幅・総ステップ数は、爆発解析時[1]の設定値と同一である。

本解析では、気体の流れ場の特性を模擬するため、分子間力に式(3)のLennard-Jones potentialの斥力部分を用いる（カットオフ半径は  $r_c = 2^{1/6}$ ）。また、微小ノイズの影響も検討するため、爆縮過程の解析には、3章で述べたControlled noiseをBit MD解析に付加する。但し、ここでは、ノイズ量の効果としてノイズ粒子数  $N_{cn}$  にのみ注目した。従って、ノイズなし（ $N_{cn}/N=0\%$ ）のケース以外に、ノイズ効果を検討するため、 $N_{cn}/N = 1, 10, 100\%$ （ノイズあり）の3ケースを併せて解析した。尚、ノイズありの解析では、ノイズを与える頻度は全時間ステップ、ノイズのシフト量は最小格子幅  $1[\Delta L]$  と設定する。また、本解析のBit MDの整数演算精度は30bit-integers、正方形セルのセル長は  $L=320$  であるため、最小格子幅は  $\Delta L = 320/2^{30} \approx 3 \times 10^{-7}$  である。

はじめに、Bit MD解析による爆発現象の概要を把握するため、爆発過程の時刻  $t_{Ex}=0, 2, 8, 14, 20$  の熱力学的温度分布  $T$  をFig. 2に示す。ここで、Fig.2の横軸  $r$  は、爆発開始時刻（ $t_{Ex}=0$ ）のhot dropletの中心を原点とした半径方向距離である。また、 $T$  は半径方向速度  $V_r$  を考慮した熱力学的温度である。尚、本章の結果は全て、10回のシミュレーションのアンサンブル平均を施した結果である。Fig.2の爆発開始後の時刻  $t_{Ex}=2$  の温度分布を見ると、hot dropletの急膨張により、hot droplet と background gasの境界で急激に温度が上昇し、温度不連続面が形成されることが分かる（この不連続面は、ランキン・ユニゴオの関係式、分子シミュレーション解析による他の研究等<sup>(12-14)</sup>との比較から、いわゆる圧縮衝撃波に相当することを確認している）。一方、hot dropletが断熱膨張するため、この不連続面の中心側では温度が低下している。また、爆発現象であるため、不連続面が時間の経過とともに中心から外側へと伝播することが確認できる。

次に、上記の爆発現象の  $t_{Ex}=20$  の解析結果に時間反転操作を施し、爆縮過程の検討を試みる。爆縮解析による各時刻の熱力学的温度  $T$  および半径方向速度  $V_r$  の分布をFig. 3に示す。ここで、爆縮過程の時刻  $t_{im}=6, 12, 16, 18, 20$  は、爆発過程の時刻  $t_{Ex}=14, 8, 4, 2, 0$  に対応する。

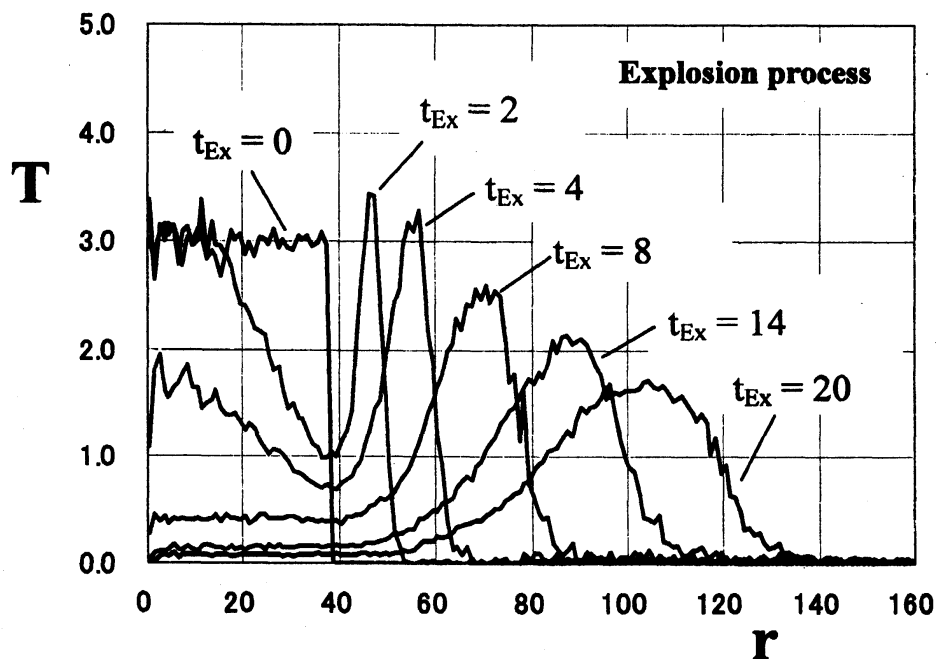


Fig. 2 Radial distributions of thermal temperature (Explosion).

尚, Fig.3では, 半径方向速度 $V_r$ は中心 $r=0$ に向かう方向を負と定義している。はじめに, ノイズが全くない理想的な可逆状態の解析結果 (without noise:  $N_{\text{cn}}/N=0\%$ ) に注目すると, 時間の経過とともに, 熱力学的温度 $T$ および半径方向速度 $V_r$ の各不連続面は, その不連続性を保持したまま原点方向に向かって伝播する。従って, この不連続面は, 流体力学的な衝撃波の一種である。さらに, 不連続面の通過後, 速度が急激に減速し, 温度も急激に低下することから, この不連続面は流体力学のいわゆる膨張衝撃波に相当すると考えられる。すなわち, ミクロな物理法則の可逆性に基づくBit MDの爆縮解析から, 膨張衝撃波が形成されることが示された。また, 時刻 $t_{\text{lm}}=20$ の爆縮過程の解析結果 (Fig. 3) は, 爆発過程の時刻  $t_{\text{Ex}}=0$  の解析結果 (Fig.2) と完全に一致することから, 3章の検討結果と同様に, Bit MDの厳密な時間可逆性も確認できる。

最後に, Bit MDを用いた爆縮解析に微小ノイズ (Controlled noise) を与え, ノイズが膨張衝撃波に与える影響を検討する。Fig. 3から,  $N_{\text{cn}}/N=1\%$  の最も小さいノイズを与えたケースでも, 膨張衝撃波の不連続面が急激に消失することが分かる。しかし, この膨張衝撃波が急激に消失する様子は, 付加するノイズ量を $N_{\text{cn}}/N=1\%$  から10%, 100%と増加させても大きく変化しない。従って, ノイズ量の大小ではなく, 可逆性を喪失させるノイズの存在自体に, 膨張衝撃波の生成が影響されていると考えられる。また, ノイズが付加されたケースでは, 膨張衝撃波に相当する不連続面が, 拡散的な広がりをもった分布, いわゆる膨張波に変化している。以上から, 不可逆性を誘発する微小ノイズを与えることで, 不安定な膨張衝撃波が消失し, 代わりにマクロな流体現象として妥当な膨張波が形成されたと解釈できる。

## 5. まとめ

数値解析に内在する数値的不可逆性と自然界にみられるマクロ現象の不可逆性を検討するため, ミクロな基礎物理法則の可逆性を厳密に再現するBit MDを用いて, 一般に不可逆過程と考えられている二つの非平衡現象の時間反転解析を行い, 以下の知見を得た。

- [1] 厳密に時間可逆なBit MDを用いて, Loschmidtの可逆性パラドックスを解析すると, H定理に反してH関数は増加し, マクロな不可逆現象とは相容れない非物理的な挙動を示す。すなわち, ミクロな物理法則の可逆性に基づくBit MDを用いると, 本来不可逆と考えられていた「非平衡状態から平衡状態へのプロセス」が, 時間反転可能である。一方, 浮動小数点演算を用いた通常のMD解析は, 丸め誤差のため, マクロ現象の不可逆性に類似した数値的不可逆性を有している。また, この丸め誤差による数値的不可逆性は, Bit MDに適切なノイズ (Controlled noise) を付加することで模擬可能である。
- [2] 気体中の膨張衝撃波をミクロな物理法則の視点から検討するため, Bit MDを用いて, 爆発現象を時間反転させ, 時間反転後の爆縮過程を解析した。その結果, ミクロな物理法則の可逆性に基づく限り, 爆発現象を時間反転させると, 爆縮過程において非物理的な膨張衝撃波が形成される。しかし, 本計算プロセスで形成された膨張衝撃波は, ノイズに非常に敏感であり, 極めて不安定である。すなわち, マクロ現象の不可逆性に相反する膨張衝撃波は微小ノイズによって消失し, 代わりに, マクロな流体現象 (いわゆる物理現象) として妥当な膨張波に変化する。

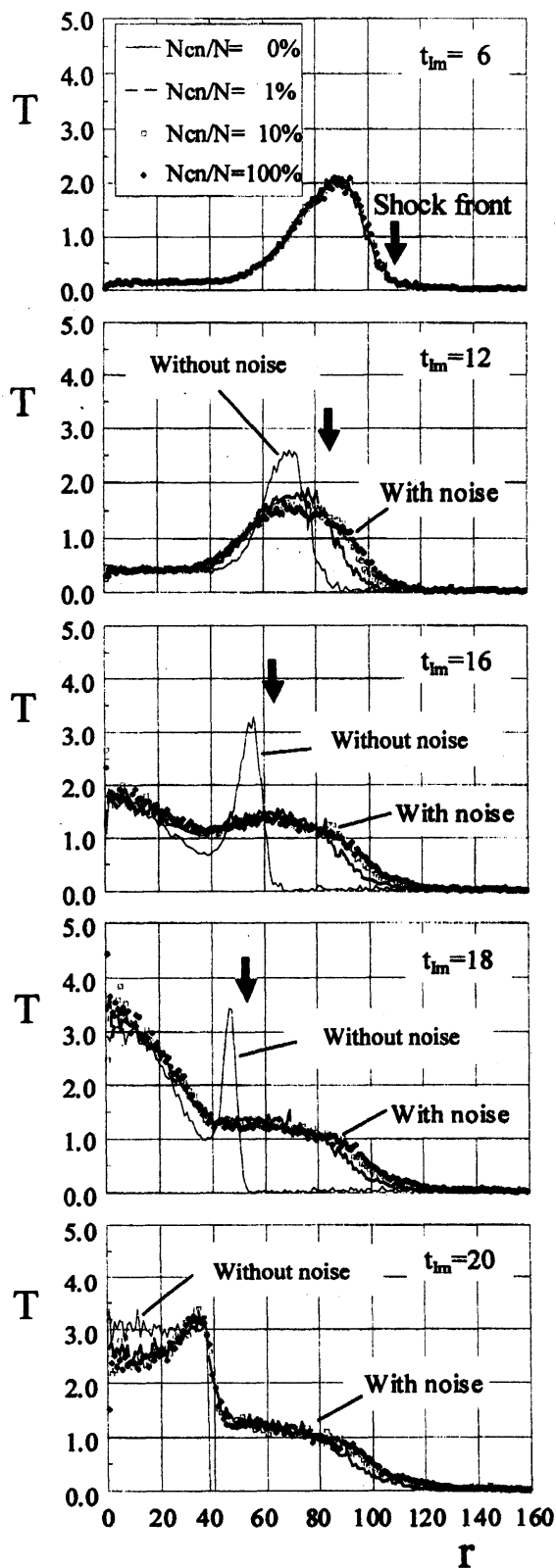
マクロな自然現象が不可逆である要因は多数議論されているが, ミクロな物理法則の視点からみると, その要因の一つとして, 本研究で検討した自然界の様々なゆらぎも挙げられるのではないだろうか。



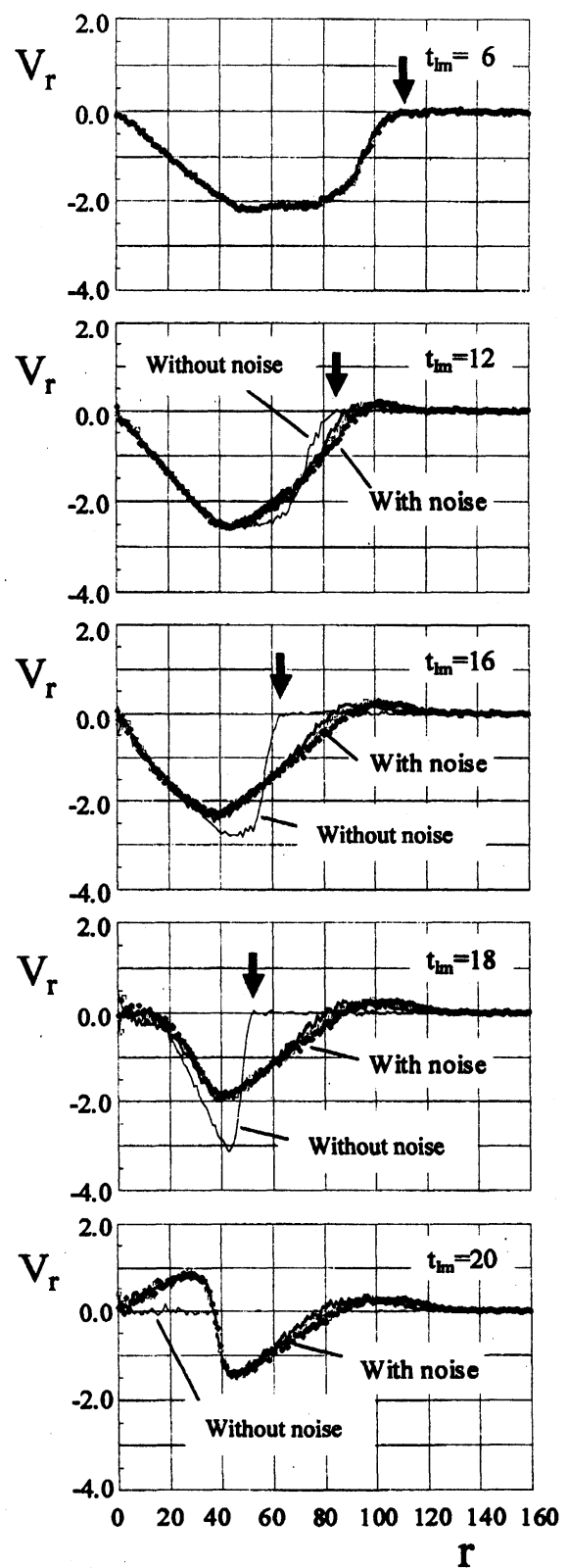
## 参考文献

- (1) N. Komatsu, Numerical Irreversibility in Molecular Dynamics Simulation, 学位論文 (工学), 東京大学, 2004年.
- (2) N. Komatsu and T. Abe, Physica D, 195, pp.391-397(2004), Comput. Phys. Comm., 171, pp.187-196 (2005). Conference on Computational Physics, Italy, Aug.-Sep., 2004. Conference on Computational Physics, CCP2004, Books of abstracts, Vol. 28 D, pp.105-107. 小松信義, 安部隆士, 第8回分子動力学シンポジウム講演論文集pp.1-6, 東京, 2003年5月. 第35回流体力学講演会, 京都, 2003年9月.
- (3) N. Komatsu and T. Abe, Expansion shock waves in the implosion process from a time-reversible molecular-dynamics simulation of a dual explosion process, Phys. of Fluids (*submitted*). Proc. of 25th Int. Sympo. on Rarefied Gas Dynamics, Saint-Petersburg, Russia, July, 2006. 小松信義, 安部隆士, 第11回分子動力学シンポジウム講演論文集pp.89-92, 長岡, 2006年5月. 日本流体力学会年会2006講演論文集pp.211 (CD-ROM: AM06-15-011, pp.1-4), 福岡, 2006年9月.
- (4) L. Boltzmann, Wiener Berichte, 63, 275(1872).
- (5) J.L. Lebowitz, Physics Today, Sep., 32(1993).
- (6) W.G. Hoover, Time reversibility, computer simulation and chaos, World Scientific Publishing Co., 1999.
- (7) Zeldovichの予測に基づき, Thompsonが理論でBorisovが実験で示したように, liquid-vaporの臨界点付近において膨張衝撃波が発生する。しかし, 一般に, 気体中では膨張衝撃波は存在しないと考えられている。J. Zeldovich, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 16, pp.363-368(1946). P.A. Thompson, and K.S. Lambrakis, J. Fluid Mech. 60, pp.187-208(1973). A.A. Borisov., Al.A. Borisov, S.S. Kutateladze and V.E. Nakoryakov, J. Fluid Mech. 126, pp.59-73(1983).
- (8) W.G. Hoover, Phys. Rev. Lett. 42, pp.1531-1534(1979).
- (9) B.L. Holian, W.G. Hoover, B. Moran and G.K. Straub, Phys. Rev. A 22, pp.2798-2808(1980).
- (10) J. Orban and A. Bellemans., Physics Letters, 24A, 620(1967).
- (11) D. Levesque and L. Verlet, J. Stat. Phys., 72, 519(1993).
- (12) T.E. Itina, J. Hermann, P. Delaporte and M. Sentis, Phys. Rev. E 66, 066406(2002).
- (13) F. Garrelie, J. Aubreton and A. Catherinot, J. Appl. Phys. 83, pp.5075-5082(1998).
- (14) P. Gaspard and J. Lutsko, Phys. Rev. E 70, 026306(2004).

尚, 本研究の参考文献の詳細は, 文献(1)-(3)の参考文献に記されています。



(a) Thermal temperature



(b) Radial velocity

**Fig.3 Radial distributions of the thermal temperature and radial velocity (Implosion).**  
 The arrow in each figure represents a shock front of an expansion shock wave in the case of  $N_{cn}/N=0\%$ .